

**Ergänzende Gleichungen für die Umkehrfunktionen
 $T(p,h)$, $v(p,h)$ und $T(p,s)$, $v(p,s)$
für das kritische und überkritische
Zustandsgebiet von Wasser
zur Industrie-Formulation IAPWS-IF97**

K. Knobloch, H.-J. Kretzschmar
Hochschule Zittau/Görlitz (FH)
Fachgebiet Technische Thermodynamik

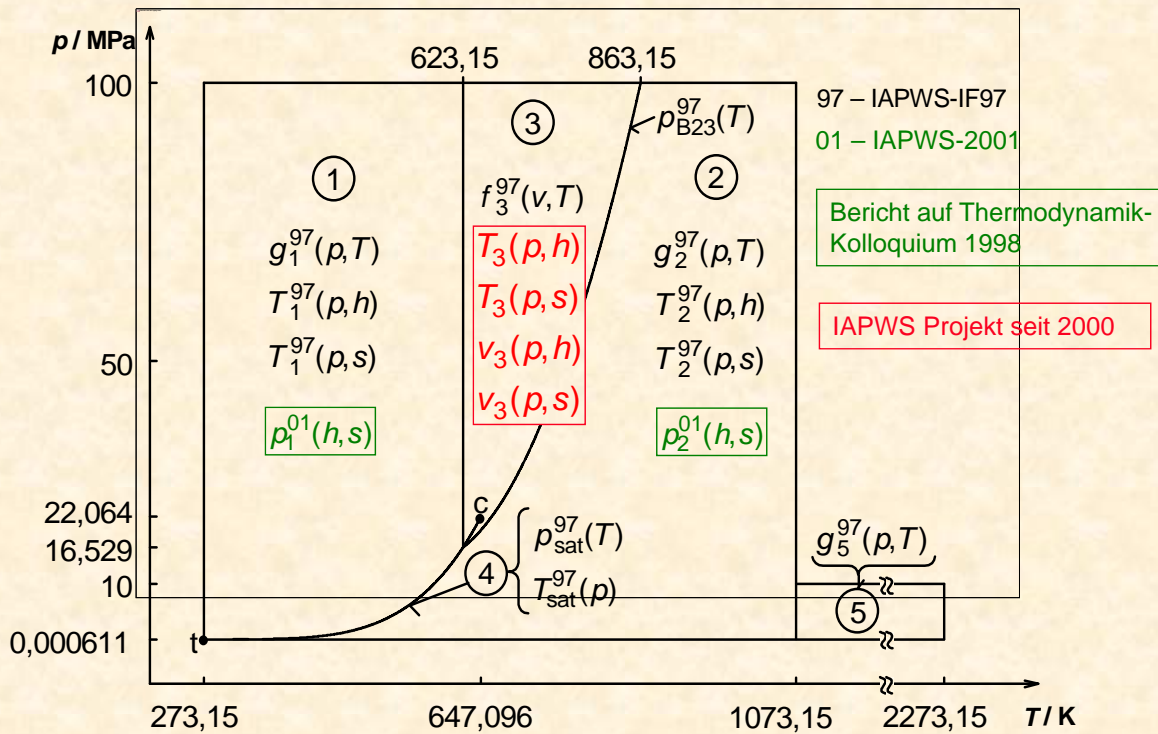
A. Dittmann
Technische Universität Dresden
Lehrstuhl für Technische Thermodynamik

VDI-Thermodynamik-Kolloquium
Wernigerode, 07.10. - 08.10.2002

Inhalt

- Einleitung
- Anforderung an die Gleichungen
- Der Gleichungssatz
- Erreichte Genauigkeit
- Rechenzeitvergleich zur IAPWS-IF97
- Zusammenfassung

Die Industrie-Formulation IAPWS-IF97, der ergänzende Standard IAPWS-2001 und neue Rückwärtsgleichungen für Bereich 3



Weshalb Entwicklung von Gleichungen $T_3(p,h)$, $v_3(p,h)$ und $T_3(p,s)$, $v_3(p,s)$ für das kritische und überkritische Gebiet ?

Prozessberechnungen benötigen Funktionen mit den Variablen (p,h) oder (p,s)



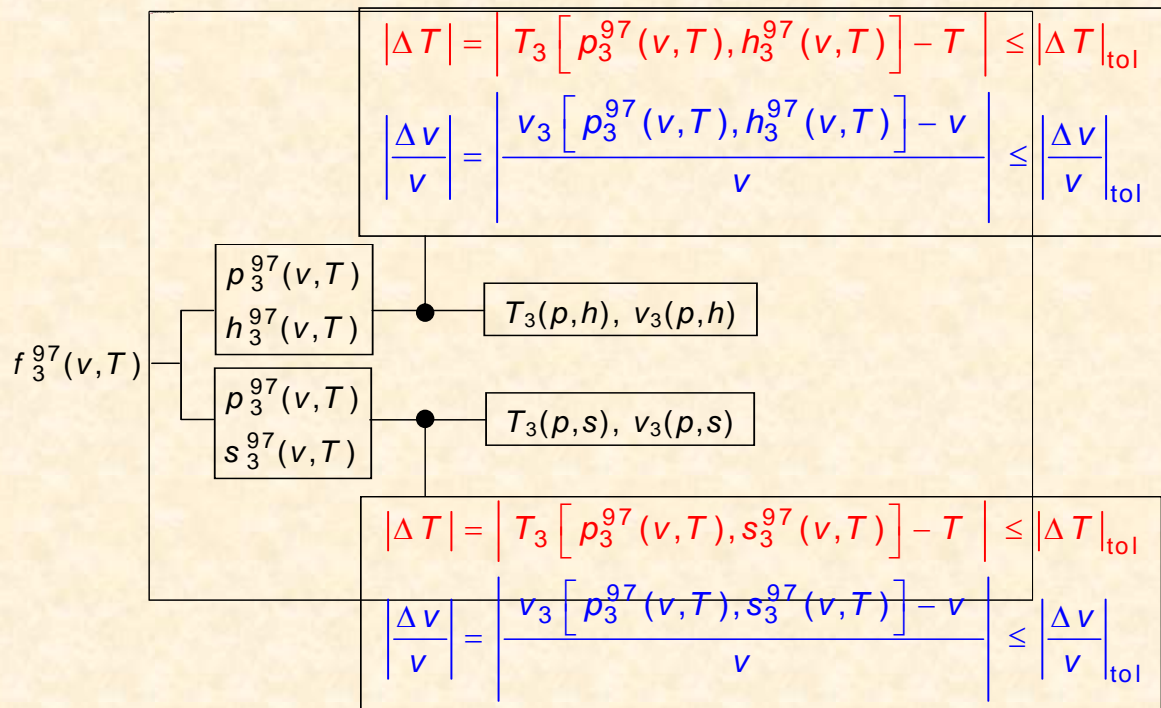
Iterative Berechnung aus der IAPWS-IF97 Fundamentalgleichung	
Funktionen von (p,h)	Funktionen von (p,s)
Zwei-dimensionale Iteration von v und T aus:	Zwei-dimensionale Iteration von v und T aus:
$p = p_3^{97}(v,T)$ und $h = h_3^{97}(v,T)$	$p = p_3^{97}(v,T)$ und $s = s_3^{97}(v,T)$
} abgeleitet von $f_3^{97}(v,T)$	} abgeleitet von $f_3^{97}(v,T)$



$T_3(p,h)$, $v_3(p,h)$ Rückwärtsgleichungen **$T_3(p,s)$, $v_3(p,s)$**

verringern die Rechenzeit der Prozessmodellierung.

Anforderung an die Numerische Konsistenz zur IAPWS-IF97



Anforderung an die Numerische Konsistenz zur IAPWS-IF97

Bestimmung der zulässigen Werte ΔT_{tol} und Δv_{tol}

ΔT_{tol} : - Anforderung der IAPWS an die Gleichungen $T(p, h)$ und $T(p, s)$

Δv_{tol} : - Ableitung aus den totalen Differentialen

$$\Delta v_{\text{tol}} = \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_h \Delta T_{\text{tol}} + \left(\frac{\partial v}{\partial h} \right)_T \Delta h_{\text{tol}}$$

$$\Delta v_{\text{tol}} = \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_s \Delta T_{\text{tol}} + \left(\frac{\partial v}{\partial s} \right)_T \Delta s_{\text{tol}}$$

- Berechnung der Differentialquotienten mit der IAPWS-IF97
- Übernahme der Werte für Δh_{tol} und Δs_{tol} aus den angrenzenden Bereichen 1 und 2 (Resultat einer Umfrage der IAPWS)

	$ \Delta T_{\text{tol}} $	$ \Delta h_{\text{tol}} $	$ \Delta s_{\text{tol}} $	$ \Delta v/v _{\text{tol}}$
Bereich 3	25 mK	80 J kg ⁻¹	0,10 J kg ⁻¹ K ⁻¹	0,01 %
kritischer Punkt	0,49 mK	-	-	0,0001 %

Approximationsverfahren

Algorithmus

- Dissertationen: *T. Zschunke* (1990), *T. Willkommen* (1995), *J. Trübenbach* (1998)
- Berichte auf Thermodynamik-Kolloquia: 1991, 1995, 1998

Basis Strukturoptimierungsmethode von *Wagner* und *Setzmann*

Modifikationen

- Automatisierte Generierung und Optimierung des Termvorrates
- Optimierung von nichtlinearen Parametern
- Automatische Stützpunktichtung mit dem Ziel: Minimierung der maximalen Abweichung
- Berücksichtigung der Anwendungsrechenzeit bei der Optimierung der Gleichungsstruktur

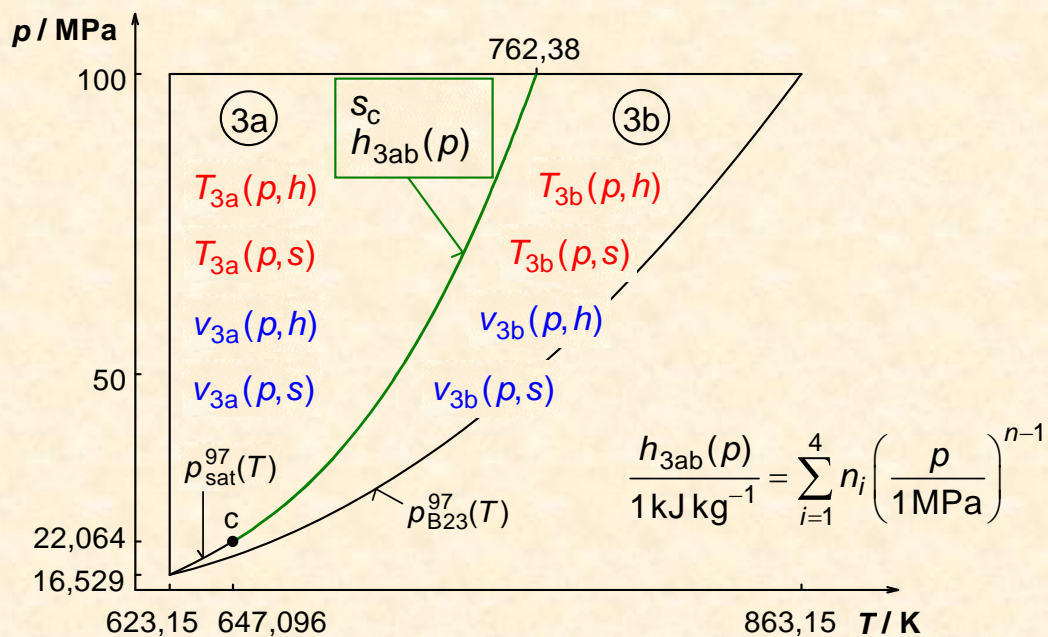
Datenbasis Industrie-Formulation IAPWS-IF97

Hardware SGI Origin2000 mit 48 Prozessoren



Gesamtrechenzeit: 10 Tage pro Termvorrat

Struktur des Gleichungssatzes



Rückwärtsgleichungen $T(p,h)$ und $v(p,h)$ für den Bereich 3

Unterbereich 3a

$$\frac{T_{3a}(p,h)}{760\text{K}} = \sum_{i=1}^{31} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,240 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2300\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,615 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +12 \quad , \quad j_i = 0 \dots +22$$

$$\frac{v_{3a}(p,h)}{0,0028\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}} = \sum_{i=1}^{32} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,128 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2100\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,727 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +8 \quad , \quad j_i = 0 \dots +22$$

Unterbereich 3b

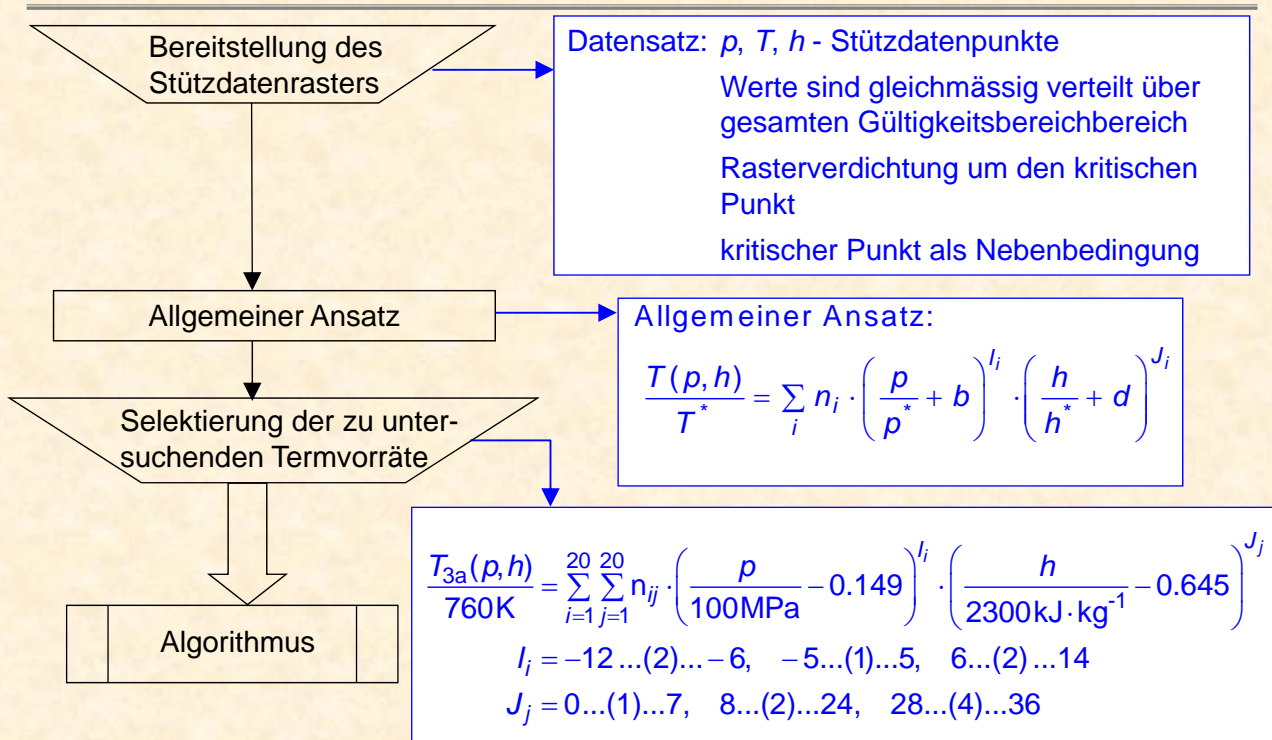
$$\frac{T_{3b}(p,h)}{860\text{K}} = \sum_{i=1}^{33} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,298 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2800\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,720 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +8 \quad , \quad j_i = 0 \dots +16$$

$$\frac{v_{3b}(p,h)}{0,0088\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}} = \sum_{i=1}^{30} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,0661 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2800\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,720 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +2 \quad , \quad j_i = 0 \dots +10$$

Stützdatenraster, allgemeiner Ansatz und Termvorrat der Gleichung $T_{3a}(p,h)$



Rückwärtsgleichungen $T(p,h)$ und $v(p,h)$ für den Bereich 3

Unterbereich 3a

$$\frac{T_{3a}(p,h)}{760\text{K}} = \sum_{i=1}^{31} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,240 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2300\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,615 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +12 \quad , \quad j_i = 0 \dots +22$$

$$\frac{v_{3a}(p,h)}{0,0028\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}} = \sum_{i=1}^{32} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,128 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2100\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,727 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +8 \quad , \quad j_i = 0 \dots +22$$

Unterbereich 3b

$$\frac{T_{3b}(p,h)}{860\text{K}} = \sum_{i=1}^{33} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,298 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2800\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,720 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +8 \quad , \quad j_i = 0 \dots +16$$

$$\frac{v_{3b}(p,h)}{0,0088\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}} = \sum_{i=1}^{30} n_i \cdot \left(\frac{p}{100\text{MPa}} + 0,0661 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{h}{2800\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}} - 0,720 \right)^{j_i}$$

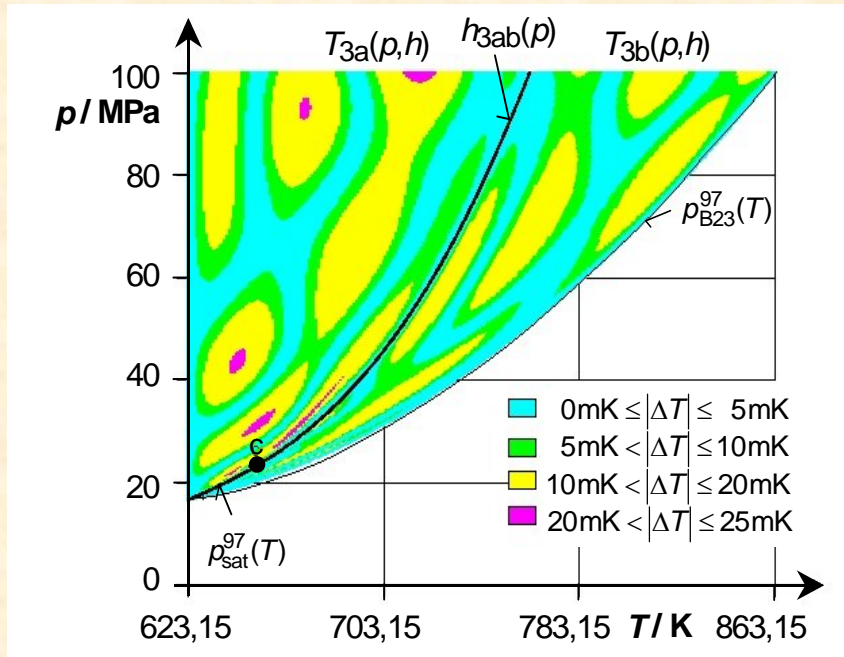
$$l_i = -12 \dots 0 \dots +2 \quad , \quad j_i = 0 \dots +10$$

Erreichte Numerische Konsistenz der Gleichungen $T(p,h)$ und $v(p,h)$ zur IAPWS-IF97

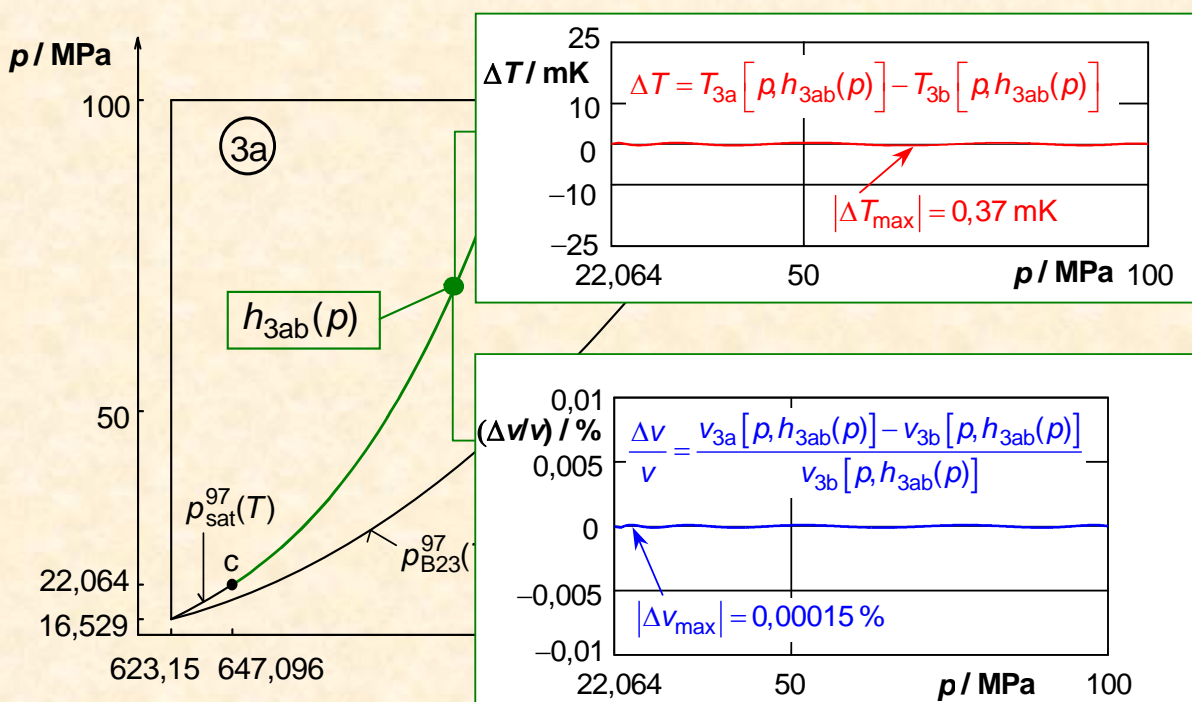
Gleichung	$ \Delta T_{\text{tol}} $	$ \Delta T_{\text{max}} $
$T_{3a}(p,h)$	25 mK	23,6 mK
$T_{3b}(p,h)$	25 mK	19,6 mK
Gleichung	$ \Delta v / v _{\text{tol}}$	$ \Delta v / v _{\text{max}}$
$v_{3a}(p,h)$	0,01 %	0,0080 %
$v_{3b}(p,h)$	0,01 %	0,0095 %

Die kritische Temperatur und das kritische spezifische Volumen werden von den Gleichungen $T(p,h)$ und $v(p,h)$ exakt wiedergegeben.

Erreichte Numerische Konsistenz der Gleichungen $T(p,h)$ zur IAPWS-IF97 in einer Übersicht



Erreichte Numerische Konsistenz zwischen den Rückwärtsgleichungen entlang der Unterbereichsgrenze $h_{3ab}(p)$



Rückwärtsgleichungen $T(p,s)$ und $v(p,s)$ für den Bereich 3

Unterbereich 3a

$$\frac{T_{3a}(p,s)}{760 \text{ K}} = \sum_{i=1}^{33} n_i \cdot \left(\frac{p}{100 \text{ MPa}} + 0,240 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{s}{4,4 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}} - 0,703 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +10 \quad , \quad j_i = 0 \dots + 36$$

$$\frac{v_{3a}(p,s)}{0,0028 \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}} = \sum_{i=1}^{28} n_i \cdot \left(\frac{p}{100 \text{ MPa}} + 0,187 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{s}{4,4 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}} - 0,755 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +6 \quad , \quad j_i = 0 \dots + 28$$

Unterbereich 3b

$$\frac{T_{3b}(p,s)}{860 \text{ K}} = \sum_{i=1}^{28} n_i \cdot \left(\frac{p}{100 \text{ MPa}} + 0,760 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{s}{5,3 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}} - 0,818 \right)^{j_i}$$

$$l_i = -12 \dots 0 \dots +14 \quad , \quad j_i = 0 \dots + 24$$

$$\frac{v_{3b}(p,s)}{0,0088 \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}} = \sum_{i=1}^{31} n_i \cdot \left(\frac{p}{100 \text{ MPa}} + 0,298 \right)^{l_i} \cdot \left(\frac{s}{5,3 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}} - 0,816 \right)^{j_i}$$

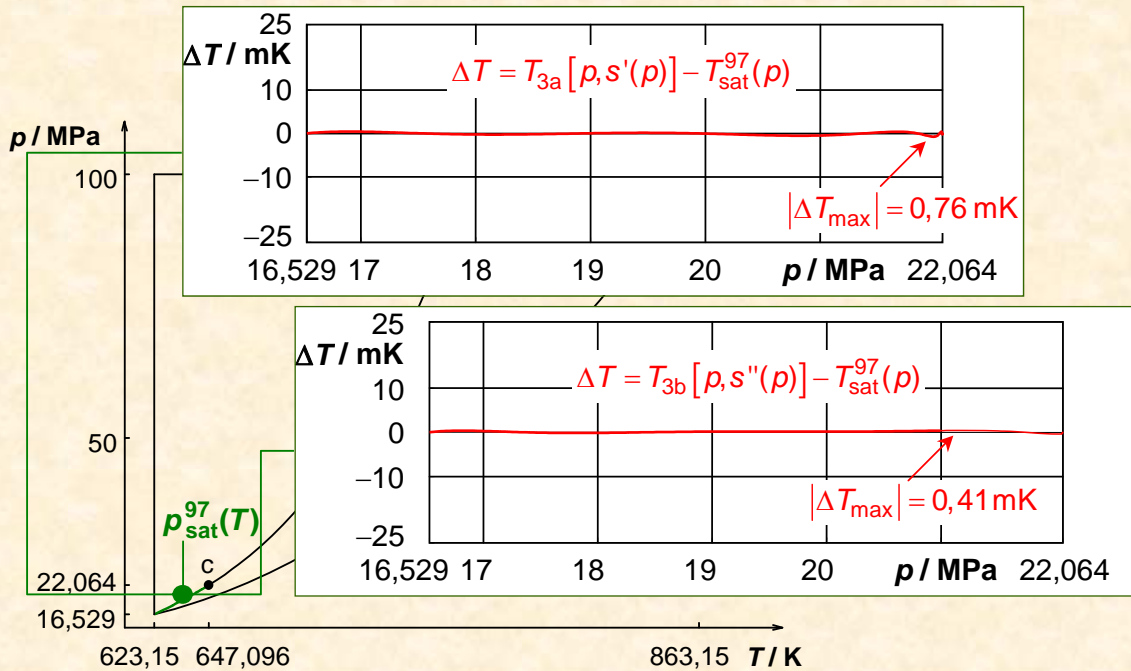
$$l_i = -12 \dots 0 \dots +2 \quad , \quad j_i = 0 \dots + 12$$

Erreichte Numerische Konsistenz der Gleichungen $T(p,s)$ und $v(p,s)$ zur IAPWS-IF97

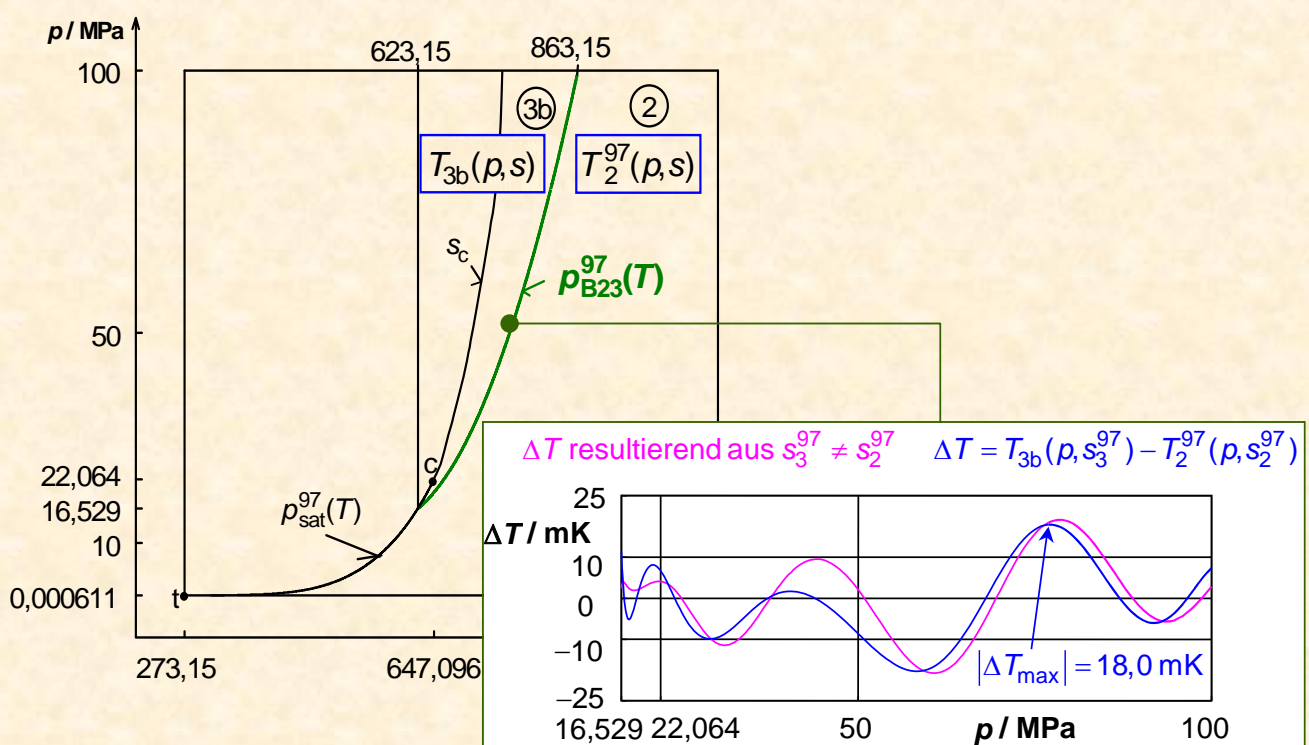
Gleichung	$ \Delta T_{\text{tol}} $	$ \Delta T_{\text{max}} $
$T_{3a}(p,s)$	25 mK	24,7 mK
$T_{3b}(p,s)$	25 mK	22,1 mK
Gleichung	$ (\Delta v / v)_{\text{tol}} $	$ (\Delta v / v)_{\text{max}} $
$v_{3a}(p,s)$	0,01 %	0,0096 %
$v_{3b}(p,s)$	0,01 %	0,0077 %

Die kritische Temperatur und das kritische spezifische Volumen werden von den Gleichungen $T(p,s)$ und $v(p,s)$ exakt wiedergegeben.

Erreichte Numerische Konsistenz von $T_{3a}(p, s)$ und $T_{3b}(p, s)$ mit der IAPWS-IF97 Gleichung $T_{\text{sat}}^{97}(p)$ entlang der Sättigungslinie



Erreichte Numerische Konsistenz von $T_{3b}(p, s)$ mit der IAPWS-IF97 Rückwärtsgleichung $T_2^{97}(p, s)$ entlang der Bereichsgrenze $p_{B23}^{97}(T)$



Rechenzeitbedarf im Vergleich zur IAPWS-IF97

Messung der Rechenzeit:

- Basis: IAPWS Benchmark Programm NIFBENCH
 - Testplattform:
 - Computer: PC mit Pentium 4, 1500 MHz
 - Betriebssystem: Windows 2000®
 - Compiler: Compaq Visual Fortran 6.1®, Standardoptionen
 - Art des ausführbaren Programms: Fortran Console Application
-

Computing Time Ratio (CTR Wert):

$$CTR = \frac{\text{Rechenzeit der IAPWS-IF97}}{\text{Rechenzeit der neuen Rückwärtsgleichungen}}$$

Iterationsverfahren bei der Berechnung mit IAPWS-IF97:

- 2-dimensionales Newton-Verfahren
- Konvergenzkriterien: $|\Delta T_{it}| = 25 \text{ mK}$ und $|\Delta v/v|_{it} = 0,01\%$

Rechenzeitbedarf im Vergleich zur IAPWS-IF97

	Berechnung $T, v(\rho, h)$ mit		CTR
	Rückwärtsgleichungen	2-dimensionalen Iteration	
Unterbereich	Rechenzeit	Rechenzeit	
3a	0,55 $\mu\text{s}/\text{call}$	123 $\mu\text{s}/\text{call}$	224
3b	0,52 $\mu\text{s}/\text{call}$	111 $\mu\text{s}/\text{call}$	212

	Berechnung $T, v(\rho, s)$ mit		CTR
	Rückwärtsgleichungen	2-dimensionalen Iteration	
Unterbereich	Rechenzeit	Rechenzeit	
3a	0,53 $\mu\text{s}/\text{call}$	208 $\mu\text{s}/\text{call}$	393
3b	0,49 $\mu\text{s}/\text{call}$	188 $\mu\text{s}/\text{call}$	384

Zusammenfassung

Rückwärtsgleichungen $T(p,h)$, $v(p,h)$ und $T(p,s)$, $v(p,s)$
für Bereich 3 der IAPWS-IF97 wurden präsentiert.



Erreichte numerische Konsistenz ausreichend für Prozessberechnungen



2-dimensionale Iterationen können vermieden werden



Berechnung $T, v(p,h) \Rightarrow$ 200 mal schneller als IAPWS-IF97

Berechnung $T, v(p,s) \Rightarrow$ 350 mal schneller als IAPWS-IF97

Zusammenfassung

Rückwärtsgleichungen $T(p,h)$, $v(p,h)$ und $T(p,s)$, $v(p,s)$
für Bereich 3 der IAPWS-IF97 wurden präsentiert.



**Entwickelten Rückwärtsgleichungen
in der Evaluierungsphase seit IAPWS-Meeting 2002**



Annahme als ergänzender Standard für 2003 vorgesehen